



PREGLED TEHNIČKE LITERATURE I DOKUMENTACIJE

Uređuje: Domagoj Vrsaljko

PROCESNO INŽENJERSTVO

Lorenz T. Biegler

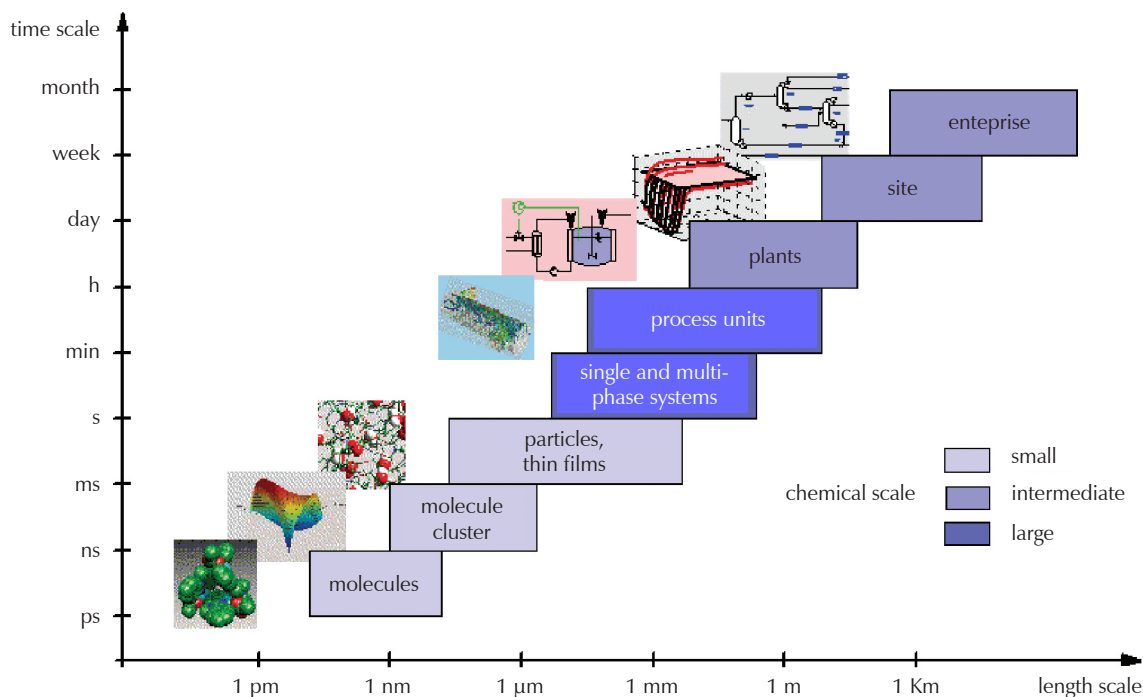
Novija postignuća u optimiranju kemijskih procesa
(Recent Advances in Chemical Process Optimization)

Odlučivanje i sustavne strategije optimiranja osnovne su komponente procesnog inženjerstva, tijekom projektiranja, poslovanja, vođenja ili analize procesa. Za različite vremenske i duljinske skale razvijeni su moćni alati za prediktivno modeliranje. Modeli i zadatci na više skala pojavljuju se kod svih realnih primjera u procesnom inženjerstvu. Vremenske i duljinske skale mogu obuhvatiti preko 15 redova veličina i uključivati vladanje elektrona, atoma, molekula, skupina

molekula, pa sve do procesnih jedinica, pogona i poduzeća. Osnovne alate optimiranja čine modeli i algoritmi za (a) planiranje eksperimenta, procjenu parametra, razvoj modela i statističku analizu, (b) analizu sinteze procesa, projektiranje i retrofit, (c) vođenje i optimiranje tijekom procesa i (d) planiranje, raspoređivanje i integraciju procesnih operacija u opskrbni lanac.

Ova studija daje sažeti pregled najnovijih dostignuća u optimiranju procesa s posebnim naglaskom na nelinearno programiranje. Opisano je nekoliko metoda uključujući sukcesivno kvadratno programiranje i metodu unutarnje točke. Osim toga, opisane su najnovije metode formuliranja problema i okoline za modeliranje te su uspoređene s popularnim alatima za simulaciju problema. Na kraju istraživanja istaknuti su trendovi u višerazinskom optimiranju velikog broja jednadžbi.

Izvor: Chem. Ing. Tech. **86** (7) (2014) 943–952



Slika – Kemijski opskrbni lanac (izvor: Grossman, Westberg (2000), <http://www.nap.edu/>)

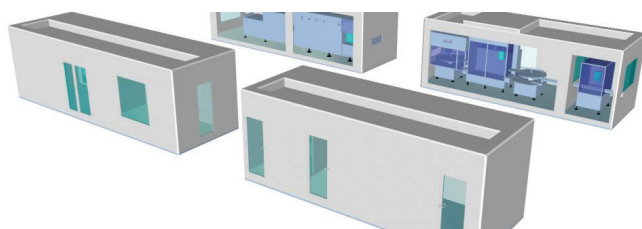
C. Bramsiepe i sur.

Informatika za inovativno projektiranje procesa i postrojenja

(Information Technologies for Innovative Process and Plant Design)

Kemijsku i farmaceutsku industriju sve više karakterizira tržišna kolebljivost i sve veća diverzifikacija proizvoda. Razdoblje između razvoja proizvoda i potpuno operative tvornice – tzv. vrijeme uvođenja (eng. *lead time*) mora se svesti na minimum kako bi se smanjili rizici ulaganja. U industriji farmaceutika i finih kemikalija za ekonomski uspjeh novih proizvoda osobito je važno smanjiti vrijeme razvoja procesa. U farmaceutici, klinička ispitivanja troše mnogo vremena i zato ti testovi brzo zahtijevaju materijale na razini gotovog proizvoda. S druge strane, patentna zaštita je ograničena, a na taj način i rok za značajnu ekonomsku zaradu. Fleksibilni mali pogoni zasnovani na standardiziranim modulima mogu pomoći ulasku u te buduće trendove. Također, navodi se da trenutačni razvoj modularnih tehnologija u Evonik Industries AG ima cilj smanjiti vrijeme uvođenja za 50 %.

Ovaj napis ukratko rezimira najnoviju situaciju u projektiranju kemijsko inženjerskih procesa i postrojenja kako bi se izgradili temelji za daljnju raspravu. Na temelju toga analizira se koliko su prikladni trenutačno raspoloživi programi za razvoj procesa i smanjenje vremena uvođenja te koje tehnologije je još potrebno razvijati. Opisana su dva inovativna pristupa projektiranju procesa i postrojenja s posebnim osvrtom na modularne kontinuirane pogone na maloj skali.



Slika – Modularni pogoni koje nudi IPM Technologies dostavljaju se po metodi ključ u ruke. Nude postrojenja za farmaceutsku industriju i biotehnoške laboratorije. (izvor: <http://prod-ipm.fr/>)

Izvor: Chem. Ing. Tech. 86 (7) (2014) 966–981

F. Trespalacios i I. E. Grossmann

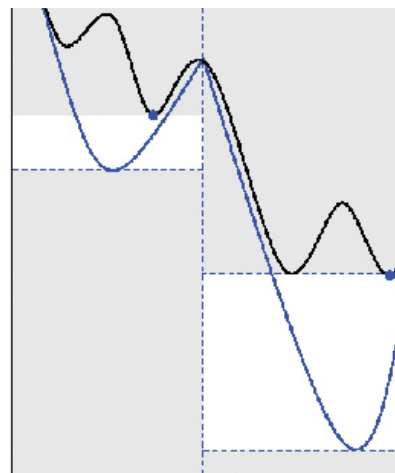
Pregled mješovito-cjelobrojnih nelinearnih i generaliziranih disjunktivnih metoda programiranja

(Review of Mixed-Integer Nonlinear and Generalized Disjunctive Programming Methods)

Mnogi problemi optimizacije zahtijevaju modeliranje diskretne i kontinuirane varijable, što dovodi do rasta uporabe mješovito-cjelobrojnih linearnih i mješovito-cjelobrojnih nelinearnih metoda programiranja (eng. *mixed-integer linear and mixed-integer nonlinear programming*, MILP/MINLP). Mješovito-cjelobrojne linearne metode programiranja primjenjuju modele u kojima su funkcija cilja i ograničenja linearna, zovemo ih MILP problemi. MINLP problemi uključuju nelinearne funkcije cilja i/ili nelinearna ograničenja. Iako su MINLP problemi nekonveksni, MINLP se može podijeliti u dvije kategorije, konveksne MINLP-e i nekonveksne MINLP-e. Mnoge primjene procesnog inženjerstva modelirane su primjenom MINLP-a. Nadalje, mnogi razvoji u MINLP-u i globalnom optimiranju bili su motivirani primjenama u procesnom inženjerstvu. U literaturi je dan sveobuhvatan pregled MINLP

metoda u sintezi procesa, projektiranju destilacijskih kolona i sekvenciranju, mreže izmjenjivača topline i cjevovoda, kontroli procesa i molekulskom dizajnu.

Ovaj rad donosi pregled glavnih deterministički mješovito-cjelobrojnih nelinearnih metoda programiranja za probleme s konveksnim i nekonveksnim funkcijama. Dan je i pregled za izvođenje MINLP formulacija kroz generalizirano disjunktivno programiranje (eng. *generalized disjunctive programming*, GDP), koje je alternativni prikaz više razine MINLP problema. U radu je dan pregled metoda rješavanja problema GDP-a, a opisane su i važne primjene MINLP-a i GDP-a u procesnom inženjerstvu.



Slika – Nekonveksna funkcija s višestrukim minimumima (izvor: <http://www.math.hu-berlin.de/>)

Izvor: Chem. Ing. Tech. 86 (7) (2014) 991–1012

J. van Baten i M. Pons

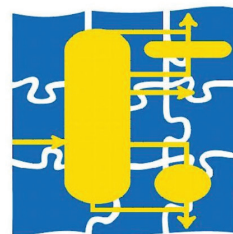
CAPE-OPEN: Interoperabilnost industrijskih procesnih simulatora

(CAPE-OPEN: Interoperability in Industrial Flowsheet Simulation Software)

Modeli procesnih shema glavni su dio svakog projektiranja procesa, upravljanja procesom, obuke operatera, studije izvedivosti, procjene okolišnog životnog ciklusa i procjene utjecaja na okoliš većine procesne industrije (kemijska, petrokemijska, rafinerijska, nafte i plina, farmaceutska, itd.). Model procesnih shema sadrži jedinične operacije koje predstavljaju modele opreme, koji su povezani putem materijalnih i energetskih tokova. Ukupna procesna shema povezuje modele jediničnih operacija i modele tokova zajedno u graf međusobnih ovisnosti, obično predstavljenih dijagramom. Prilikom proračuna procesnih tokova postavljaju se bilance topline i tvari, a nepoznati procesni uvjeti se rješavaju. Kako bi se osiguralo da je to učinjeno na termodinamički dosljedan način, termodinamički modeli definirani su na razini procesne sheme i stavljeni na raspolaganje jediničnim operacijama. Modeli procesnih shema (eng. *flowsheet simulations*) izrađuju se u procesnim simulatorima (eng. *flowsheet software*). Uloga i arhitektura tih softverskih alata dobro je dokumentirana. Komercijalni procesni simulatori naširoko se upotrebljavaju u industriji, akademskim istraživanjima i konzultantskim aktivnostima. Takvi procesni simulatori sadrže niz ugrađenih, tj. generičkih, jediničnih operacija i termodinamičkih modela. Ti generički modeli nisu uvijek u mogućnosti opisati razne kemijske smjese i komade opreme koji se nalaze u praksi.

Krajnji korisnici oslanjaju se na specijalno izrađene modele kako bi se nosili s tim ograničenjima. Neki od tih specijalno izrađenih modela dostupni su na tržištu, ali znatan dio tih specijalno izrađenih modela je ograničen na uporabu unutar tvrtke kako bi se zaštitilo intelektualno vlasništvo. Novi modeli neprestano se razvijaju kao produkt istraživanja u poduzećima i na sveučilištima. Procesni simulatori obično omogućuju dodavanje specijalno izrađenih modela jedinica i termodinamičkih modela putem patentiranih sučelja. Obično to zahtijeva kodiranje takvih modela u okviru specifičnom za određeni procesni simulator, a zatim dinamičko i statičko povezivanje modela s procesnim simulatorom. Iako taj pristup dobro radi u praksi, napravljeni specijalno izrađeni modeli ograničeni su samo na rad s procesnim simulatorima za koji su napravljeni. Povezivanje na druge procesne simulatore, a u nekim slučajevima čak i ažuriranja na noviju verziju istog simulatora zahtijeva dodatno programiranje. CAPE-OPEN (*Computer-Aided Process Engineering*) industrijski je standard za interoperabilnost koji pruža metodologiju u kojoj se jedinične operacije i termodinamički modeli koriste jednim setom zajedničkih sučelja koja podržavaju svi relevantni procesni simulatori.

Kemijski proces modeliranja i simulacija naširoko se primjenjuju u procesnim industrijama za napredak u razumijevanju i poboljšanju mnogih procesa. Zbog složenosti i raznolikosti tih procesa, često je potrebno nekoliko komada softvera za modeliranje određenog procesa i stoga zahtijevaju interoperabilnost između softvera. CAPE-OPEN industrijski je standard za interoperabilnost između procesa simulacije softvera. U usporedbi sa zaštićenim sučeljem softverskih aplikacija, CAPE-OPEN omogućuje manje troškove na programiranje i održavanje, brz pristup tržištu i zajedničku osnovu za suradnju na zajedničkim projektima.



CO ▼ LaN

Slika – CO-LaN (eng. *the CAPE-OPEN Laboratories Network*) neutralna je industrijska i akademska udruga koja promiče standarde otvorenih sučelja u procesnim simulatorima

Izvor: Chem. Ing. Tech. 86 (7) (2014) 1052–1064

P. Renze i sur.

Simulacija koalescencije, raspada, i prijenosa mase u polidisperznim višefaznim sustavima

(Simulation of Coalescence, Breakup, and Mass Transfer in Polydisperse Multiphase Flows)

Tablica 1 – Komercijalni procesni simulatori koji imaju implementiranu podršku za CAPE-OPEN

Proizvod	Proizvođač
AspenPlus	AspenTech
Aspen HYSYS	AspenTech
ChemCAD	ChemStations
gPROMS	PSE
Indiss Plus	RSI
Multiphysics	COMSOL
Petro-SIM	KBC
Pro/II	Invensys / SimSci
ProMax	BR&E
ProSimPlus	ProSim
Unisim Design	Honeywell
Vali	Belsim

Polidisperzni sustav kapljevina-plin vrlo se često susreće u kemijskoj industriji. U višefaznim reaktorima plin se ponekad dovodi u kontakt s kapljevitom fazom u svrhu poboljšanja miješanja, ali u većini slučajeva masa se prenese iz jedne faze u drugu. Općenito, plinovi se moraju otopiti u kapljevinu, gdje se reakcija obično odvija, a reakcijski proizvodi se odvajaju. Raznolikost fenomenoloških problema zajedničkih takvim tokovima jedan su od najvećih izazova u procesnom i reakcijskom inženjerstvu. Do sada se oblikovanje tehničkih uređaja, kao što su kolona s mjehurićima ili reaktor s miješalom, temeljilo na poluempirijskim korelacijama ili pokusima provedenim na malim skalama. Simulacije provedene primjenom računalne dinamike fluida (eng. *computational fluid dynamics*, CFD) mogu znatno poboljšati razumijevanje tih procesa, ali su skupe zbog dva razloga. Prvo, višefazni tokovi su intrinzično nestabilni i primjena stacionarnog stanja je rijetka. Drugo, pravi tehnički reaktori su obično geometrijski složeni, na primjer, kolone s mjehurićima imaju opremu poput plitica, pakiranja, osovine ili snopove cijevi. Pojednostavljenja su često komplicirana i umanjuju točnost simulacija.

U ovome je radu u OpenFOAM-u implementirani model s dvije tekućine proširen da bi obuhvatio polidisperznosti disperzne faze povezivanjem CFD-a s modelima populacijskih bilanci.

Izvor: Chem. Ing. Tech. 86 (7) (2014) 1088–1098